

Table 44. Variation of atomic charges for conformers of **III**

Atom	Conformer		Mean value
	1R, 1S	2R, 2S	
O1	-1.16	-1.16	-1.16
O2	-1.11	-1.11	-1.11
N1	-1.12	-1.13	-1.12
N3	-1.10	-1.09	-1.09
C2	1.78	1.77	1.77
C4	0.38	0.38	0.38
C4'	0.02	0.02	0.02
C5	-0.03	-0.04	-0.04
C6	0.38	0.40	0.39
C6'	0.03	0.04	0.03
C5'	0.94	0.95	0.94
C5''	-0.01	-0.01	-0.01
H1	0.40	0.41	0.41
H3	0.40	0.39	0.40
H4	0.05	0.01	0.03
H41	-0.01	-0.01	-0.01
H42	0.03	0.00	0.01
H43	-0.01	0.01	0.00
H61	0.01	0.06	0.04
H62	0.03	-0.01	0.01
H63	0.03	0.06	0.05
H51''	0.04	0.04	0.04
H52''	0.01	0.01	0.01
H53''	0.01	0.01	0.01
$\Sigma$	0.01	0.01	0.01